

*К.Б. Чавченко, студент гр. ПБ-72мп*  
КПІ ім. Ігоря Сікорського

## **ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ ФУНКЦІЇ МІНІМІЗАЦІЇ НА ТОЧНІСТЬ МЕТОДУ ІНВЕРСНОГО МЕТОДУ МОНТЕ-КАРЛО**

**Анотація.** У статті описаний метод Монте-Карло, вказано переваги та проблеми цього методу, та описано загальний алгоритм інверсного методу, що застосовується для визначення оптичних властивостей тканин (коефіцієнт поглинання, коефіцієнт розсіювання і коефіцієнт анізотропії) з спектрофотометричних вимірювань (загальний коефіцієнт пропускання, дифузне відбиття і колімоване пропускання). Також приведено результати моделювань отримані за допомогою розробленого програмного забезпечення для п'яти функцій мінімізації, та проаналізовано погрешності кожної з функцій.

**Ключові слова:** моделювання, інверсний метод Монте-Карло, біологічні тканини, функція, мінімізація.

### **ВСТУП**

Визначення оптичних властивостей біологічних тканин є досить трудомістким завданням через складну структуру самої тканини і різноманіття процесів взаємодії фотонів з нею. Більшість біологічних середовищ (БС) відносяться до оптично мутних випадково-неоднорідних середовищ, для яких коефіцієнт розсіювання може перевищувати коефіцієнт поглинання до сотні разів [1]. Внаслідок цього задача виокремлення частки поглинання та розсіювання в ослаблення інтенсивності пропущеного або відбитого світла пов'язана зі значними труднощами.

Сучасна біомедична діагностика ґрунтується на визначенні оптичних властивостей БС шляхом розв'язку основного рівняння теорії переносу випромінювання наближеними чисельними методами. Найпростішим з математичної точки зору, проте достатньо складним з огляду на техніку проведення експерименту, вважають наближення першого порядку, яке справедливе для тонких або слабо-розсіювальних БС. Дифузне наближення використовується для опису ізотропного розсіювання, у той час як малокутове наближення застосовується у випадку наявності значних розсіювальних неоднорідних включень у тонких біологічних зразках. Потоківі моделі (моделі Кубелки—Мунка) непридатні для середовищ з високою анізотропією розсіювання. Методи Монте-Карло (МК) та їх модифікації використовуються для середовищ з довільною конфігурацією і будь-якими граничними умовами та найбільш широко застосовуються в біомедичній оптиці [2].

Метод Монте-Карло, який базується на стохастичному моделюванні переміщення фотонів в розсіювальному БС. Завдяки цьому метод МК широко використовується, хоч і вимагає складних та досить об'ємних обчислень. Як правило, метод використовується для верифікації результатів аналітичних моделей. У зв'язку з цим видається актуальним вдосконалення алгоритмів методу МК для визначення оптичних властивостей різних біологічних тканин.

Алгоритмізація поширення світла в багатошарових біологічних тканинах методом МК включає послідовний розгляд взаємодії падаючого фотона з певною початковою вагою з центром розсіювання (поглинання) в окремому шарі. Результати моделювання – це координати виходу фотона з БС зі зменшеною вагою і направляючими косинусами, які формують просторовий розподіл

розсіяного випромінювання в фотоприймальній площині вимірювальної системи з урахуванням механізму трасування [3].

Однак інші оптичні властивості БС, зокрема коефіцієнт розсіяння  $\mu_s$  і коефіцієнт поглинання  $\mu_a$ , можуть бути обчислені тільки шляхом ітераційного механізму мінімізації цільових функцій з використанням зворотних методів [4].

## ЗАГАЛЬНИЙ АЛГОРИТМ ІНВЕРСНОГО МЕТОДУ МОНТЕ-КАРЛО

Для визначення оптичних властивостей  $\mu_a$  та  $\mu_s$ , як і фактору анізотропії розсіяння  $g$ , по виміряним значенням спектральних коефіцієнтів повного пропускання  $T_t^{експ}$ , дифузного відбиття  $R_d^{експ}$  і колімованого пропускання  $T_c^{експ}$  застосовується інверсний метод МК, який дозволяє врахувати структуру БС, параметри експериментальної установки, геометрію вимірювань та інші параметри [5]. Метод інверсного МК заснований на розрахунку великого числа випадкових траєкторій фотонів в розсіювальному БС. При цьому розрахунок траєкторій поширення світла в середовищі відбувається на основі фазової функції Хенї - Грінштейна [6].

Експериментально виміряні коефіцієнти дифузного відбиття, повного та колімованого пропускання є початковими даними для визначення оптичних властивостей БС. Завдання розрахунку цих параметрів може бути сформульоване як задача оптимізації, яка полягає в мінімізації деякої цільової функції шляхом підбору відповідних  $\mu_a$ ,  $\mu_s$ ,  $g$  в рамках прямого МК.

Для обчислення оптичних властивостей біотканин методом інверсного МК було розроблено програмне забезпечення, яке працює за загальним алгоритмом, який коротко можна описати наступним чином:

1. За відомими експериментальними даними  $T_t^{експ}$ ,  $T_c^{експ}$  і  $R_d^{експ}$  обчислюються початкові наближені значення  $\mu_a$ ,  $\mu_s$  і  $g$  за допомогою наступних співвідношень [7, 8]:

$$\frac{\mu_s'}{\mu_a + \mu_s'} = \begin{cases} 1 - \left( \frac{1 - 4R_d^{експ} - T_t^{експ}}{1 - T_t^{експ}} \right)^2, & \text{при } \frac{R_d^{експ}}{1 - T_t^{експ}} < 0.1 \\ 1 - \frac{4}{9} \left( \frac{1 - 4R_d^{експ} - T_t^{експ}}{1 - T_t^{експ}} \right)^2, & \text{при } \frac{R_d^{експ}}{1 - T_t^{експ}} > 0.1 \end{cases}, \quad (1)$$

$$(\mu_a + \mu_s')d = \begin{cases} -\frac{\ln T_t^{експ} \ln 0.05}{\ln R_d^{експ}}, & \text{при } R_d^{експ} \leq 0.1 \\ 2^{1+5(R_d^{експ} - T_t^{експ})}, & \text{при } R_d^{експ} > 0.1 \end{cases}, \quad (2)$$

$$(\mu_a + \mu_s)d = -\ln T_c^{експ}, \quad (3)$$

де  $\mu_s' = (1 - g)\mu_s$  - транспортний коефіцієнт розсіяння,  $d$  - товщина зразка, а  $T_c^{експ}$  - колімоване пропускання ( $T_c^{експ} = T_t^{експ} - R_d^{експ}$ ).

2. По розрахованим за допомогою формул (1-3) наближеним значенням методом прямого МК знаходяться нові розраховані значення  $T_t^{розн}$ ,  $T_c^{розн}$  і  $R_d^{розн}$ .

3. Далі будується цільова функція та проводиться процедура її мінімізації:

$$F = (T_t^{експ} - T_t^{розн})^2 + (R_d^{експ} - R_d^{розн})^2, \quad (4)$$

4. У якості критерію закінчення процедури мінімізації використовується одна із цільових функцій (для прикладу взято модульну функцію):

$$\frac{|T_t^{експ} - T_t^{розн}|}{T_t^{експ}} + \frac{|R_d^{експ} - R_d^{розн}|}{R_d^{експ}} \leq \varepsilon, \quad (5)$$

де  $\varepsilon$  - величина відхилення розрахованих параметрів від експериментальних.

Підбір цільової функції оптимізації в інверсному МК дозволяє мінімізувати загальну похибку визначення оптичних коефіцієнтів при реальному експерименті та моделюванні.

Оскільки на кожному кроці мінімізації при обчисленні цільової функції потрібне проведення розрахунків  $T_t^{розн}$ ,  $T_c^{розн}$  і  $R_d^{розн}$ , що вимагає значних обчислень і великих обчислювальних ресурсів, то у програмі використовується метод мінімізації цільової функції на основі методу золотого перетину [9], що дозволяє знайти мінімум цільової функції за досить мале звернення до неї. Проведені моделювання показали, що для знаходження мінімуму з точністю  $\varepsilon = 0.01$  у всьому спектральному діапазоні потрібно в середньому 10-30 звернень.

Для перевірки точності функцій мінімізації за допомогою експерименту були отримані оптичні коефіцієнти для тканини легень свині з товщиною, яка забезпечувала близьке до нуля значення коефіцієнта пропускання, тобто імітувала напів-нескінченне середовище. На підставі отриманих значень була проведена серія моделювань для п'яти функцій оптимізації: модульної (на рис.1 мітка М), квадратичної (на рис.1 мітка КВ), квадратичної по дельтам дифузного відбиття та повного пропускання (на рис.1 мітка КВ2), квадратичної за відносними погрішностями суми дифузного відбиття та повного пропускання (на рис.1 мітка КВ3), логарифмічною (на рис.1 мітка Л).

Основним параметром функцій оптимізації була сума відносних похибок коефіцієнтів дифузного відбиття і повного пропускання які утворюють відносну похибку. Відносна похибка функцій оптимізації для легень свині за результатами серії моделювань показана на рисунку 1.

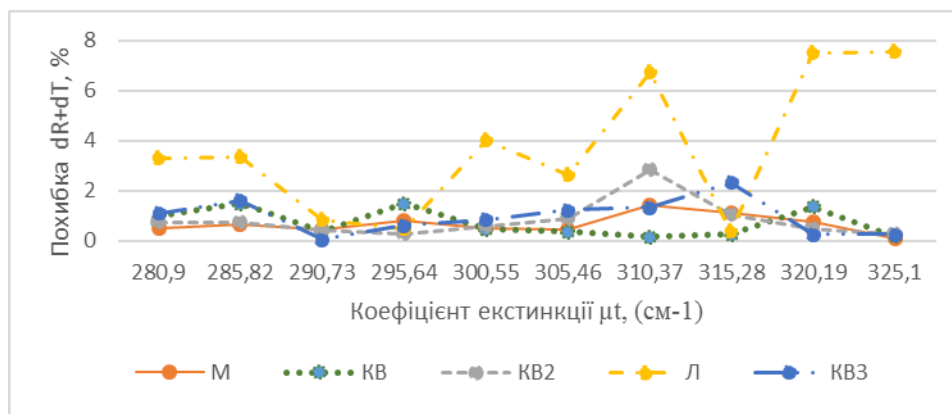


Рисунок 1. Значення відносної похибки моделювань для п'яти функцій мінімізації для діапазону коефіцієнтів екстинкції

З отриманого графіку видно, що для змодельованої тканини найкраще себе проявила модульна функція, яка має найменшу похибку без сильних коливань для різних значень коефіцієнту екстинкції. Розглянуті види квадратичної функції мінімізації мають практично однакову похибку, яка трохи більша ніж у модульної функції. Логарифмічна функція має найбільшу похибку, у результаті чого найменш придатна для моделювань параметрів даної тканини.

## **ВИСНОВКИ**

Моделювання методом інверсного Монте-Карло є досить ефективним засобом для визначення параметрів біологічних середовищ не зважаючи на великий об'єм обчислень, що збільшує час розрахунків. Аналіз загального алгоритму методу дозволяє правильно удосконалити етапи розрахунку шляхом оптимізації початкового алгоритму. Це сприяє меншій затраті часу обчислення та покращенню точності кінцевих даних, що є попередньою умовою для отримання та порівняння реальних і змодельованих даних. У результаті серії модулювань показано мінімальні похибки розрахунків отриманих шляхом вирішення задачі мінімізації цільових функцій.

## **СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ**

1. Оптическая биомедицинская диагностика / пер. с англ.; под ред. В.В. Тучина. М.: Физматлит, 2007. Т. 1. 560 с.; Т. 2. 368 с.
2. Безугла Н.В. Вплив осової анізотропії розсіяння біологічних середовищ на точність визначення оптичних коефіцієнтів методом Монте-Карло / Н.В. Безугла, М.О. Безуглий, Г.С. Тимчик, К.П. Вонсевич // Наукові вісті НТУУ "КПІ". – 2015, №1 (99). – С.85 – 91.
3. Bezuglyi, M., N. Bezuglaya, and A. Viruchenko. "On the possibility of ellipsoidal photometry and Monte Carlo simulation to spatial analysis of biological media." *Electronics and Nanotechnology (ELNANO), 2017 IEEE 37th International Conference on.* IEEE, 2017.
4. M. A. Bezuglyi, N. V. Bezuglaya, S. Kostuk, "Influence of laser beam profile on light scattering by human skin during photometry by ellipsoidal reflectors", *Devices and Methods of Measurements.* 9(1):56-65, 2018.
5. Bashkatov A.N., Genina E.A. and Tuchin V.V. Optical properties of skin, subcutaneous and muscle tissues: a review // *Journal of innovative optical health sciences.* 2011. Vol. 4. P. 9–38.
6. Henyey L.G., Greenstein J.L. Diffuse radiation in the galaxy // *Astrophys. J.* 1941. Vol. 93. P. 70–81.
7. Van Gemert M.J.C., Schets G.A.C., Bishop M.S. et al. Optics of tissue in a multi-layer slab geometry // *Laser Life Sci.* 1988. Vol. 1. P. 1–18.
8. Prahl S.A., Van Gemert M.J.C., Welch A.J. Determining of the optical properties of turbid media by using the adding-doubling method // *Appl. Optics.* 1993. Vol. 32. P. 359–568.
9. Магомедов М.А., Муртазаев М.А., Хизриев К.Ш. Численные методы в физике. Махачкала, 2007. 54 с.

*Наук. керівник – к.т.н., доц. Безуглий М.О.*

